

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Шамсутдинов Денис Алексеевич

Выпускная квалификационная работа

**УЧЕТ НЕЛИНЕЙНЫХ СЛАГАЕМЫХ В МЕТОДЕ МАЛОГО
ПАРАМЕТРА ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ О
ДВУХКОМПОНЕНТНОМ МАТЕРИАЛЕ С ИСКРИВЛЕННОЙ
МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕЙ**

Уровень образования: магистратура

Направление 01.04.02 «Прикладная математика и информатика»

Основная образовательная программа: ВМ.5518 «Надежность и
безопасность сложных систем»

Научный руководитель,
канд. физ.-мат. наук,
доцент,
Костырко С. А.

Рецензент,
канд. техн. наук,
Соколов А. Н.

Санкт-Петербург

2020

Оглавление

Введение	3
Глава 1. Постановка задачи	9
Глава 2. Метод возмущений	11
Глава 3. Численные результаты	17
Глава 4. Метод конечных элементов	19
Заключение	23
Список литературы	24

Введение

Тонкопленочные покрытия получили широкое применение в современной микроэлектронике и оптике. Такого рода материалы используются при производстве полупроводниковых лазеров, тонкопленочных транзисторов, жидкокристаллических дисплеев, волоконно-оптических датчиков и микроэлектромеханических систем [1]. Комбинируя материалы и структурные элементы на наноскопическом уровне, можно создавать приборы с уникальными оптическими, электрическими и магнитными свойствами. Пленочные покрытия могут служить в качестве защиты от термических, химических, радиационных и механических воздействий [2]. Но несмотря на значительный успех использования тонких пленок на практике, существует ряд проблем, связанных, в первую очередь, с их производством. Так, при создании и последующей термической либо химической обработке на свободных и межфазных поверхностях пленки могут образовываться наноразмерные канавки и трещинообразные впадины [3, 4, 5]. Изменение формы пленки приводит к ее микроструктурным изменениям и дальнейшему отслоению либо растрескиванию. Таким образом, появление топологических дефектов на внешних и внутренних поверхностях пленок непременно приводит к ухудшению их свойств и снижению срока службы приборов, созданных на их основе. С другой стороны, процесс образования топологических особенностей может быть использован для создания наноструктур с уникальными физико-механическими свойствами таких, как нанотрубки, квантовые нити и точки [6, 7, 8, 9]. В связи с этим возникает необходимость исследования процесса образования наноразмерных структур на межфазной поверхности композитных материалов и изучения влияния этих структур на физико-механическое поведение всего твердого тела.

Стоит отметить, что в настоящее время в научной мировой практике накоплен богатый материал по изучению механических свойств тонкопленочных покрытий. Были предложены методы по оценке эффективных свойств, устойчивости, разрушения и накопления повреждений. Исследованы особенности деформации и прочности элементов, созданных на основе однослойных и многослойных пленок. Принципиальные результаты при разработке соответствующих математических моделей связаны с именами таких ученых, как Р.Р. Балохонов, Р.В. Гольдштейн, М.А. Греков, М.Ю. Гуткин, Н.Ф. Морозов,

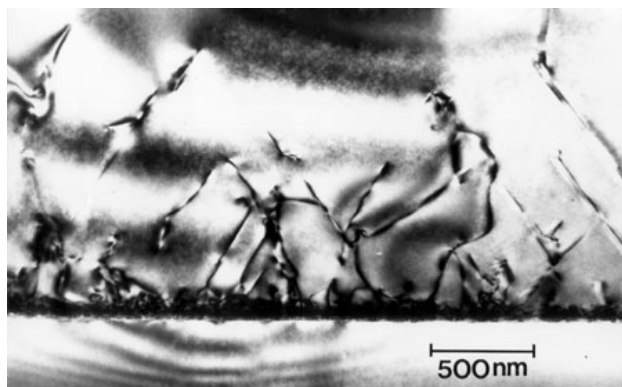


Рис. 1. Образование дислокаций вблизи межфазного интерфейса тонко-пленочного покрытия [2]

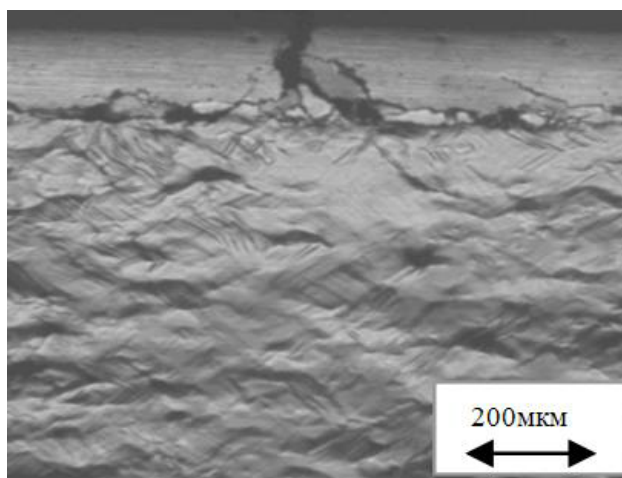


Рис. 2. Отслоение пленки от подложки [3]

И.А. Овидько, А.В. Панин, В.Е. Панин, А.Е. Романов, Ю.З. Повстенко, Я.С. Подстригач, П.Е. Товстик, А.Б. Фрейдин, R.C. Cammarata, A.G. Evans, L.B. Freund, X. Feng, H. Gao, Y. Huang, J.W. Hutchinson, F. Jonsdottir, W.D. Nix, A.J. Rosakis, B.J. Spencer, D.J. Srolovitz, G.G. Stoney S. Suresh, J.J Vlassak и многих других [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 3, 5, 7].

В последние несколько десятилетий данное направление получило существенное развитие в связи с необходимостью создания моделей для прогноза свойств наноразмерных пленочных покрытий. Хорошо известно, что механические свойства материалов с наноструктурой не поддаются прогнозированию с помощью классических моделей, так как в эти модели не заложены параметры, связанные с влиянием поверхностной энергии. Однако, с уменьшением размеров деформируемых тел до нанометрового диапазона доля приповерхностных атомов увеличивается, и они начинают оказывать заметное влияние на упругое поведение всего тела. Этот

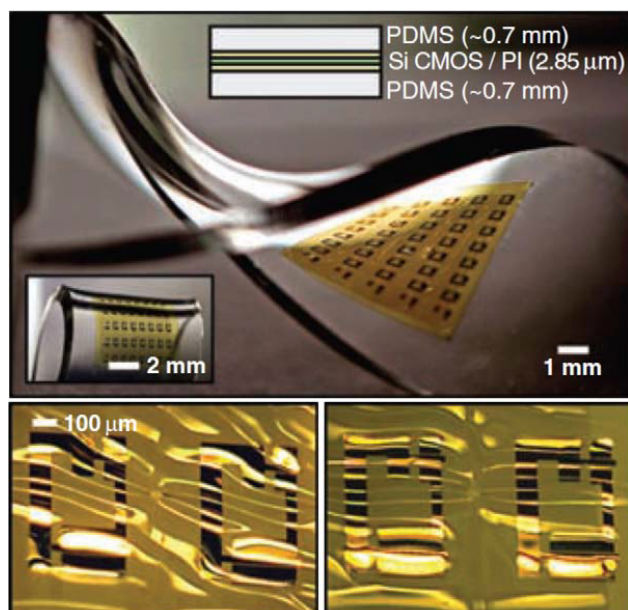


Рис. 3. Использование токих пленок в гибкой электронике [1]

эффект был подтвержден многочисленными экспериментальными работами А.Д. Коротаева, В.Ю. Мошкова, С.В. Овчинникова, Ю.П. Пинжина, В.М. Савостикова, А.Н. Тюменцева, S.E. Bobbin, M. Brink, R.C. Cammarata, J. Cao, M.J. Casavant, D.T. Colbert, S. Cuenot, H. Dai, S. Demoustier-Champagne, H.L. Duan, L.M. Erickson, A. Fartash, C. Frétiigny, E.E. Fullerton, M. Grimsditch, M. Hernández-Vélez, G.Y. Jing, M. Knobel, S. Kumar, Y.D. Li, J. Liu, P.L. McEuen, E.D. Minot, D. Navas, B. Nysten, J.Y. Park, K.R. Pirota, V. Sazonova, I.K. Schuller, R.E. Smalley, A. Smith, E.L. Silva, X.M. Sun, M. Vázquez, J.W. Wagner, D.A. Walters, J.X. Wang, Q. Wang, J. Xu, K.Y. Yaish, D.P. Yu, D. Zanchet, Z.S. Zhang и др. [18, 19, 20, 21, 16].

Расчеты на основе метода молекулярной динамики, проведенные в исследованиях И.Ф. Головнева, Е.И. Головневой, А.М. Игошкин, Л.А. Мерзиевского, В.Ф. Фомина, M.J. Buehler, A. Hartmaier, H. Gao, H. Gleiter, R.E. Miller, A.K. Mukherjee, S.R. Phillpot, V.B. Shenoy, D. Wolf, V. Yamakov, H. Yao и др. [22, 23, 24, 25, 26], позволили развить подход, в рамках которого деформируемое твердое тело рассматривается в качестве многоуровневой системы, где поверхностные слои являются отдельными подсистемами, обладающими физическими и механическими свойствами отличными от основного материала объемной части. Решению соответствующих краевых задач теории упругости, сформулированных на основе вышеописанного подхода, посвящены работы таких ученых, как П.А. Белов, Р.В. Гольдштейн, В.А. Го-

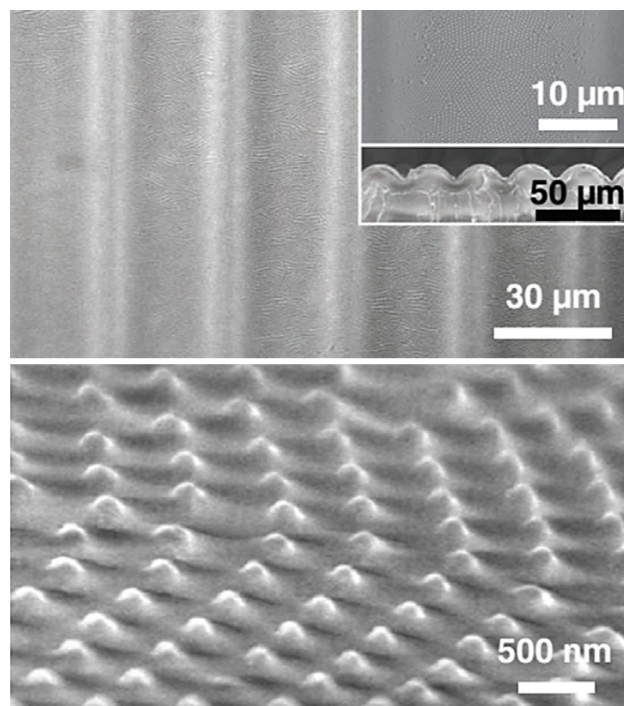


Рис. 4. Создание наноструктур на поверхности пленки [9]

родцов, М.А. Греков, М.Ю. Гуткин, В.А. Еремеев, А. Земляниной, Л.П. Лебедев, С.А. Лурье, Л. Назаренко, Н.Ф. Морозов, А.В. Панин, В.Е. Панин, Ю.З. Повстенко, Я.С. Подстригач, Ю.О. Соляев, К.Б. Устинов, Н. Altenbach, М.Е. Gurtin, A.I. Murdoch, H.L. Duan, J. Wang, Z.P. Huang, B.P. Karihaloo, L. Tian, R.K.N.D. Rajapakse, P. Sharma, S. Ganti, H.K. Stolarski, S.L. Crouch, P. Schiavone, C.-Q. Ru, Y. Benveniste, T. Miloh, D.J. Steigmann, R.W. Ogden и многих других [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 7, 11]. При этом для описания для описания поверхностной либо межфазной упругости используются различные определяющие соотношения, дополняющий обычный закон Гука для объемной фазы.

Одной из самых распространенных на данный момент моделей, позволяющих описывать деформацию поверхностных и межфазных слоев, а следовательно и учитывать влияние поверхностной/межфазной энергии, является модель поверхностной упругости Гертину–Мердока [31, 32]. Приповерхностный слой в рамках представленной модели представляется в виде упругой мембраны, которая когерентно связана с основным материалом. Таким образом, полные смещения поверхности совпадают с полными смещениями прилегающей объемной части. При этом полные поверхностные деформации связываются с полными смещениями по обычным формулам, используемым в классической теории упругости. Для связи компонент тен-

зора поверхностных напряжений с компонентами тензора поверхностных деформаций вводятся определяющие соотношения аналогичные тем, что используются в законе Гука, однако, поверхностные упругие константы и напряжения имеют размерность Н/м. Также в определяющих соотношениях учитываются остаточные напряжения, которые возникают при формировании поверхности. Стоит отметить, что в некоторых работах члены определяющих соотношений, соответствующие остаточным напряжениям, отбрасываются в предположении их малости [33, 34, 35]. В представленной работе они также не учитываются. В качестве уравнений, описывающих механическое равновесие поверхности, используются уравнения обобщенного закона Лапласа–Юнга, которые определяют скачок напряжений при переходе от объемной к поверхностной фазе, обусловленный действием поверхностных напряжений. В целом, подобный подход показал свою эффективность при решении широкого круга задач, связанных с моделированием и прогнозированием механических свойств материалов с наноструктурой в виде нановключений, нанопор, нанопроволок, нанотрубок, нановолокон, нанопленок и т.п. [36, 37, 38, 11].

Заметим, что большинство вышеупомянутых исследований были ограничены идеальной формой рассматриваемых свободных и межфазных поверхностей. Однако, как уже было отмечено, стоит принять во внимание тот факт, что при определенных условиях поверхностные атомные слои являются термодинамически неустойчивыми к зарождению и росту топологических дефектов. Это, в первую очередь, связано с изменениями на атомном уровне в результате механического, радиационного, термического или химического воздействия при производстве, обработке и эксплуатации наноматериалов [39, 40, 41]. Таким образом, одним из важнейших направлений в рамках указанной проблемы является разработка теоретических подходов, позволяющих исследовать влияние размеров и формы таких дефектов на механическое поведение наноматериала. Представленная работа является дальнейшим продолжением исследований [42, 43, 44, 45, 12, 13], связанных с разработкой теоретических моделей для изучения напряженного состояния вблизи искривленных внутренних и внешних границ твердых тел и тонкопленочных покрытий. Здесь, с использованием определяющих соотношений Гертгина–Мердока и подхода к решению соответствующей краевой

задачи, предложенного в работе [43] на основе комплексных потенциалов и метода малого параметра, проанализировано поведение окружных напряжений вдоль межфазного рельефа синусоидальной формы. Проведен анализ сходимости полученного асимптотического решения, при этом результаты расчета сравниваются с аналогичными результатами, полученными методом конечных элементов.

Глава 1. Постановка задачи

Рассматривается изотропное двухкомпонентное твердое тело в условиях плоской деформации. Сформулируем краевую задачу для бесконечной двухкомпонентной плоскости комплексного переменного $z = x_1 + ix_2$. Область межфазного интерфейса отличается по упругим свойствам от объемных материалов и согласно теории поверхностной упругости Гертина-Мёрдока [31] представляет собой пренебрежимо тонкий слой Γ прилегающий к объемным фазам Ω_1 и Ω_2 без скольжения.

$$\Gamma = \{z : z \equiv \zeta = x_1 + i\varepsilon f(x_1)\}, \quad (1)$$

$$\Omega_1 = \{z : x_2 > \varepsilon f(x_1)\}, \quad \Omega_2 = \{z : x_2 < \varepsilon f(x_1)\}. \quad (2)$$

Здесь непрерывная переодическая функция $f(x_1)$ с периодом a определяет форму интерфейса и удовлетворяет условиям $\max |f(x_1)| = a$, $|\varepsilon f'(x_1)| < 1$, $0 < \varepsilon \ll 1$.

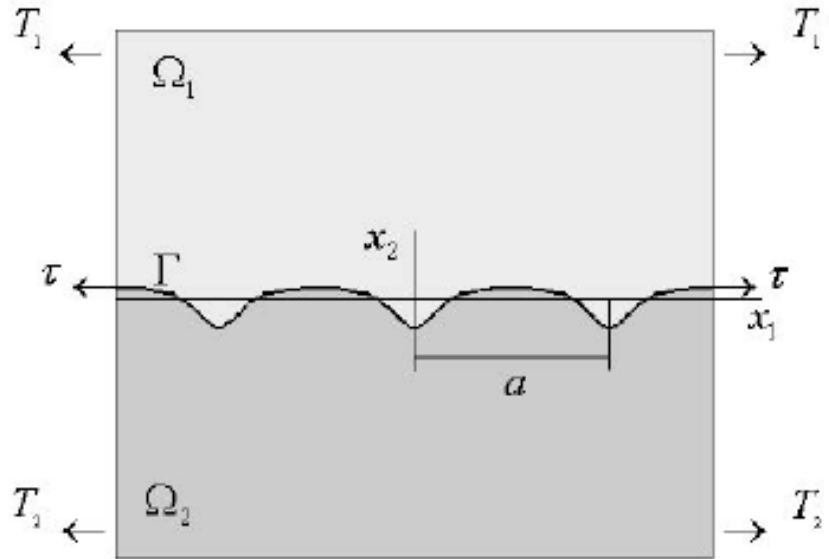


Рис. 5. Модель двухкомпонентного материала с искривленным рельефом на межфазной границе

Согласно упрощенной модели Гертина-Мёрдока, в которой не учитывается влияние остаточных напряжений, упругое поведение интерфейса

выражается следующим соотношением [31]:

$$\tau(\zeta) \equiv \sigma_{tt}^s(\zeta) = (\lambda_s + 2\mu_s)\varepsilon_{tt}^s(\zeta), \quad \zeta \in \Gamma, \quad (3)$$

где ε_{tt}^s и σ_{tt}^s это компоненты тензора поверхностных напряжений и деформаций, λ_s и μ_s — модули поверхностной упругости, аналогичные параметрам Ламе.

Закон Гука для объемных тел в терминах плоской деформации может быть записан в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{nn}(z) + \lambda_j\varepsilon_{tt}(z), \\ \sigma_{tt}(z) &= (\lambda_j + 2\mu_j)\varepsilon_{tt}(z) + \lambda_j\varepsilon_{nn}(z), \\ \sigma_{nt}(z) &= 2\mu_j\varepsilon_{nt}(z), \quad z \in \Omega_j, \quad j = \{1, 2\}, \end{aligned} \quad (4)$$

где σ_{nn} , σ_{tt} , σ_{nt} и ε_{nn} , ε_{tt} , ε_{nt} — компоненты тензора объемных напряжений и деформаций, соответственно, определенные в локальной прямоугольной системе координат (n, t) , где нормаль n направлена перпендикулярно Γ , λ_j и μ_j — коэффициенты Ламе для фазы Ω_j .

Условие механического равновесия на интерфейсе описывается в терминах обобщенного закона Юнга-Лапласа [46]:

$$\Delta\sigma(\zeta) = \sigma^+(\zeta) - \sigma^-(\zeta) = -\kappa(x_1)\tau(\zeta) + i\frac{1}{h(x_1)}\frac{d\tau(\zeta)}{dx_1} \equiv t_s(\zeta), \quad \zeta \in \Gamma, \quad (5)$$

где $\sigma^\pm(\zeta) = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} \sigma(z)$, $\sigma = \sigma_{nn} + i\sigma_{nt}$; h и κ — метрический коэффициент и кривизна интерфейса, соответственно.

На бесконечности напряжения σ_{kl} ($k, l = \{1, 2\}$) и угол поворота ω определяются следующим образом:

$$\lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{22} = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{12} = \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \omega = 0, \quad \lim_{x_2 \rightarrow \pm\infty} \sigma_{11} = T_j, \quad j = \{1, 2\}. \quad (6)$$

Предполагается, что интерфейс и объемные материалы когерентны, и скачок перемещения принимается равным нулю:

$$\Delta u(\zeta) = u^+(\zeta) - u^-(\zeta) = 0, \quad \zeta \in \Gamma, \quad (7)$$

где $u^\pm(\zeta) = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} u$, $u = u_1 + iu_2$, u_1 и u_2 - перемещения вдоль осей x_1 и x_2

Глава 2. Метод возмущений

В соответствии с подходом Мусхелишвили [47], напряженно-деформированное состояние двухкомпонентной плоскости $\Omega_1 \cup \Omega_2$ можно выразить через комплексные потенциалы Гурса-Колосова Φ_j и Υ_j [48, 49]:

$$G(z, \eta_j) = \eta_j \Phi_j(z) + \overline{\Phi_j(z)} - (\Upsilon_j(\bar{z}) + \overline{\Phi_j(z)} - (z - \bar{z})\overline{\Phi_j'(z)})e^{-2i\alpha}, \quad (8)$$

$$z \in \Omega_j, \quad j = \{1, 2\},$$

где α это угол между осями t и x_1 , горизонтальная черта означает комплексное сопряжение, штрих означает производную по отношению к аргументу. Функция $G(z, \mu_j)$ равна $\sigma(z)$ для $\eta = 1$ и равна $-2\mu_j \frac{du}{dz}$ при $\mu_j = -\varkappa_j = 3 - 4\nu_j$, ν_j - коэффициент Пуассона фазы Ω_j . При этом:

$$\lim_{|x_2| \rightarrow \pm\infty} \Upsilon_j(z) = \lim_{|x_2| \rightarrow \pm\infty} \Phi_j(z) = \frac{T_j}{4}, \quad j = \{1, 2\}.$$

где $T_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)} T_2$.

Переходя к пределу в (8) при $z \rightarrow \zeta \pm i0$ при $\alpha = \alpha_0$ и учитывая краевые условия (5) и (7), получим:

$$\begin{aligned} & m_1 \Upsilon_2^+(\bar{\zeta}) + m_2 \eta_1 \Phi_1^+(\zeta) - m_2 \Upsilon_1^-(\bar{\zeta}) - m_1 \eta_2 \Phi_2^-(\zeta) - \\ & - 2i\varepsilon f(x_1)(m_1 \Phi_2^{-'}(\zeta) - m_2 \Phi_1^{+'}(\zeta)) - \\ & - \frac{2i\varepsilon f'(x_1)}{1 + \varepsilon f'(x_1)} [m_1 \Upsilon_2^+(\bar{\zeta}) - m_2 \overline{\Phi_1^+(\zeta)} - m_2 \Upsilon_1^-(\bar{\zeta}) + m_1 \overline{\Phi_2^-(\zeta)} - \\ & - 2i(x_1)(m_1 \overline{\Phi_2^{-'}(\zeta)} - m_2 \overline{\Phi_1^{+'}(\zeta)})] = \Delta, \quad \zeta \in \Gamma, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\Phi_j^\pm(\zeta) = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} \Phi_j(z)$, $\Upsilon_j^\pm(\bar{\zeta}) = \lim_{z \rightarrow \zeta \pm i0} \Upsilon_j(\bar{z})$. Уравнение (9) учитывает краевые условия (5), когда $m_k = \eta_k = 1$, $\Delta = t_s(\eta)$, и условия (7), когда $m_k = \mu_k$, $\eta_k = -\varkappa_k$, $\Delta = 0$.

В случае криволинейного интерфейса $\zeta \neq \bar{\zeta}$, поэтому, к сожалению, невозможно получить точное решение (9) в виде явных выражений. Для

получения функций Φ_j и Υ_j в виде асимптотических разложений используется метод возмущений [43]. Согласно этому методу, решение (9) может быть получено в виде ряда по малому параметру ε :

$$\Psi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \Psi_n(z), \quad \tau(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \tau_n(\zeta), \quad (10)$$

где Ψ — любая из функций Φ_j и Υ_j . Предельные значения Φ_{jn} , Υ_{jn} и τ разложим в ряд Тейлора в окрестности $x_2 = 0$, рассматривая x_1 в качестве параметра:

$$\Xi(\zeta) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[i\varepsilon f(x_1)]^m}{m!} \Xi^{(m)}(x_1) \quad (11)$$

где Ξ — любая из функций τ , Φ_{jn}^{\pm} и Υ_{jn}^{\pm} .

Также запишем следующие разложения в ряды для $e^{-2i\alpha_0}$, $\kappa(x_1)$ и $h^{-1}(x_1)$:

$$\begin{aligned} e^{-2i\alpha_0} &= 1 + 2 \sum_{m=0}^{\infty} (-i\varepsilon f'(x_1))^{m+1}, \\ \kappa(x_1) &= \varepsilon f''(x_1) \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m (2m-1)!!}{m!} \frac{1}{2^m} (\varepsilon f'(x_1))^{2m} \right], \\ h^{-1}(x_1) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (2m+1)!}{m!} \frac{1}{2^m} (\varepsilon f'(x_1))^{2m}. \end{aligned} \quad (12)$$

Подставляя (10) - (12) в (9) и приравнивая коэффициенты при степенях ε^n , $n = \{0, 1, \dots\}$, мы приходим к последовательности краевых задач Римана-Гильберта:

$$m_1 \Upsilon_{2n}^+(\bar{\zeta}) + m_2 \eta_1 \Phi_{1n}^+(\zeta) - m_2 \Upsilon_{1n}^-(\bar{\zeta}) - m_1 \eta_2 \Phi_{2n}^-(\zeta) = H_n(x_1) + Z_n(x_1), \quad (13)$$

решения которых могут быть записаны в следующем виде [43]:

$$\begin{cases} \Phi_{1n}(z) = -\Upsilon_{2n}(z) + \Sigma_n(z) + O_n^1, & Imz > 0, \\ \Phi_{1n}(z) = -\Phi_{2n}(z) + \Sigma_n(z) + O_n^1, & Imz < 0, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \Upsilon_{2n}(z) = \frac{\mu_2 \varkappa_1 \Sigma_n(z) + V_n(z)}{\mu_2 + \mu_1 \varkappa_2} + O_n^2, & Imz > 0, \\ \Phi_{2n}(z) = \frac{\mu_2 \Sigma_n(z) + V_n(z)}{\mu_2 + \mu_1 \varkappa_2} + O_n^2, & Imz < 0, \end{cases}$$
(14)

где

$$\Sigma_n(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\tau_n'(t)}{z-t} dt + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H_n^1(t) + Z_n^{kn}(t)}{z-t} dt,$$

$$V_n(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H_n^2(t)}{z-t} dt,$$

$$H_n^1 = H_n \text{ когда } m_k = \eta_k = 1, \quad H_n^2 = H_n \text{ когда } m_k = \mu_k, \quad \eta_k = \varkappa_k;$$

$$O_0^j = T_j/4, \quad O_n^j = 0, \quad j, k = 1, 2, \quad j \neq k, \quad n = \{1, 2, \dots\},$$

$$H_0(x_1) = 0,$$

$$\begin{aligned} H_n(x_1) = & - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{n!}{m!} \left(\frac{(if)^k}{k!} \left[(-1)^k \left(m_1 \Upsilon_{2m}^{+(k)} - m_2 \Upsilon_{1m}^{-(k)} \right) + \right. \right. \\ & + m_2 \eta_1 \Phi_{1m}^{+(k)}(x_1) - m_1 \eta_2 \Phi_{2m}^{+(k)}(x_1) - 2(-1)^{k-1} k \left(\overline{m_1 \Phi_{2m}^{-(k)}(x_1)} - \overline{m_2 \Phi_{1m}^{+(k)}(x_1)} \right) \Big] - \\ & - 2(-1)^{k-1} \sum_{j=1}^k \frac{(if)^{k-j}}{(k-j)!} (if')^j \left[m_1 \Upsilon_{2m}^{+(k-j)}(x_1) - m_2 \Upsilon_{1m}^{-(k-j)}(x_1) + \right. \\ & \left. \left. + (2k-2j+1) \left(\overline{m_1 \Phi_{2m}^{-(k-j)}(x_1)} - \overline{m_2 \Phi_{1m}^{+(k-j)}(x_1)} \right) \right] \right), \end{aligned}$$

$$Z_n(x_1) = -i\tau_n'(x_1) - Z_n^{kn}(x_1) \text{ когда } m_p = \eta_p = 1,$$

$$Z_n(x_1) = 0 \text{ когда } m_p = \mu_p, \quad \eta_p = \varkappa_p, \quad p = \{1, 2\},$$

$$Z_0^{kn}(x_1) = 0,$$

$$Z_n^{kn}(x_1) = - \sum_{m=0}^n \frac{n!}{m!k!} (C_m^1 R_j - iC_m^2 Q_j), \quad n = \{1, 2, \dots\}, \quad k = n - m,$$

$$C_0^1 = \tau_0(x_1), \quad C_0^2 = \tau_0'(x_1),$$

$$\begin{aligned}
C_m^1 &= \sum_{l=1}^m \frac{m!(if)^l}{l!(m-l)!} \tau_{m-l}^{(l)}(x_1), \quad C_m^2 = \sum_{l=1}^m \frac{m!(if)^l}{l!(m-l)!} \tau_{m-l}^{(l+1)}(x_1), \\
R_{2l+1} &= \frac{(-1)^l (2l+1)!(2l+1)!!}{l!2^l} (f'(x_1))^{2l} f''(x_1), \quad R_{2l} = 0, \\
Q_0 &= 1, \quad H_{2l} = \frac{(-1)^l (2l)!(2l-1)!!}{l!2^l} (f'(x_1))^{2l}, \quad Q_{2l+1} = 0, \quad l = \{1, 2, \dots\}.
\end{aligned}$$

Далее, из (4) и (7) получим:

$$\tau(\zeta) = \frac{\lambda_s + 2\mu_s}{4\mu(\lambda + \mu)} [(\lambda + 2\mu)\sigma_{tt}(\zeta) - \lambda\sigma_{nn}(\zeta)], \quad \zeta \in \Gamma. \quad (15)$$

Из (8) следует:

$$\begin{aligned}
\sigma_{nn}(z) + i\sigma_{nt}(z) &= \Phi_j(z) + \overline{\Phi_j(z)} - (\Upsilon_j(\bar{z}) + \overline{\Phi_j(z)} - (z - \bar{z})\overline{\Phi_j'(z)})e^{-2i\alpha}, \\
\sigma_{tt}(z) + \sigma_{nn}(z) &= 4Re\Phi_j(z), \quad z \in \Omega_j, \quad j = \{1, 2\}. \quad (16)
\end{aligned}$$

Переходя в (16) к пределу $z \rightarrow \zeta - i0$ при $\alpha = \{\alpha_0, \alpha_0 + \frac{\pi}{2}\}$ и учитывая разложения (10) - (12), из (15) получим связь неизвестной функции τ_n с комплексными потенциалами n -го приближения:

$$\tau_n(x_1) = MRe[\varkappa_2\Phi_{2n}^-(x_1) + \Upsilon_{2n}^+(x_1)] + W_n(x_1), \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned}
M &= (\lambda_s + 2\mu_s)/2\mu_2 \\
W_0(x_1) &= 0 \\
W_n(x_1) &= MRe\left(\sum_{m=0}^{n-1} \frac{n!}{m!} \left[\frac{(if)^k}{k!} (\varkappa_2\Phi_{2m}^{(k)}(x_1) + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (-1)^k \Upsilon_{2m}^{(k)}(x_1) + 2(-1)^k k \overline{\Phi_{2m}^{(k)}(x_1)} - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 2(-1)^k \sum_{j=1}^k \frac{(if)^{k-j}}{(k-j)!} (if')^j (\Upsilon_{2m}^{(k-j)}(x_1) + (2k - 2j + 1) \overline{\Phi_{2m}^{(k-j)}(x_1)}) \right] \right) - \\
&\quad - n! \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(-1)^k f^{2k}}{m!(2k)!} \tau_m^{(2k)}, \quad n = \{1, 2, \dots\}, \quad k = n - m.
\end{aligned}$$

Используя формулы Сохоцкого-Племеля для предельных значений

интегралов типа Коши [47], из (17) получим следующее гиперсингулярное уравнение относительно τ_n' ($n = 0, 1, \dots$):

$$\tau_n'(x_1) - \frac{MK_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tau_n'(t)}{(t - x_1)^2} dt = F_n(x_1), \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} F_n(x_1) = & MRe \left[\frac{K_2}{2} (H_n^{1'}(x_1) + Z_n^{kn'}(x_1)) \right. \\ & + \frac{K_1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H_n^1(t) + Z_n^{kn}(t)}{(z - t)^2} dt + \\ & \left. \frac{K_3}{2} H_n^{2'}(x_1) + \frac{K_4}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{H_n^2(t)}{(z - t)^2} dt \right] + W_n'(x_1), \end{aligned}$$

$$\text{и } K_1 = \frac{\varkappa_1}{(r + \varkappa_1)} + \frac{\varkappa_2}{(1 + r\varkappa_2)}, \quad K_2 = \frac{\varkappa_1}{(r + \varkappa_1)} - \frac{\varkappa_2}{(1 + r\varkappa_2)}, \quad K_3 = \frac{1}{(\mu_1 + \mu_2\varkappa_1)} +$$

$$+ \frac{\varkappa_2}{(\mu_2 + \mu_1\varkappa_2)}, \quad K_4 = \frac{1}{(\mu_1 + \mu_2\varkappa_1)} - \frac{\varkappa_2}{(\mu_2 + \mu_1\varkappa_2)}, \quad r = \frac{\mu_1}{\mu_2}.$$

В силу периодичности функции $f(x_1)$, решение уравнения (18) ищется в виде ряда Фурье.

В случае нулевого приближения $F_0 = 0$, и мы приходим к однородному уравнению (18), которое имеет только тривиальное решение $\tau_{(0)}'(x_1) = 0$, соответствующее материалу с прямолинейной межфазной границей. Тогда напряженное состояние описывается следующим образом:

$$\Phi_{j(0)}(z) = \Upsilon j(0)(z) = T_j/4, \quad \tau_{(0)}(x_1) = \frac{M(\varkappa + 1)T_2}{8\mu_2},$$

$$\sigma_{11(0)}(z) = T_j, \quad T_1 = \frac{\mu_1(\varkappa_2 + 1)}{\mu_2(\varkappa_1 + 1)} T_2, \quad z \in \Omega_j, \quad j = \{1, 2\}.$$

Неоднородное уравнение (18) (т.е. $n > 0$) будем решать, используя свойства интеграла типа Коши. Неизвестную функцию $\tau_n(x_1)$ представим в виде ряда с неизвестными коэффициентами A_{nk} и B_{nk} :

$$\tau_n(x_1) = \sum_{k=0}^{\infty} (A_{nk} \cos(b_k x_1) + B_{nk} \sin(b_k x_1)), \quad b_k = 2\pi k/a. \quad (19)$$

Функцию $f(x_1)$ также разложим в ряд Фурье:

$$f(x_1) = \sum_{k=1}^{\infty} D_k \cos(b_k x_1), \quad D_k = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} f(x_1) \cos(b_k x_1) dx_1. \quad (20)$$

Подставляя выражения (19) и (20) в (18), приходим к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно коэффициентов A_{nk} и B_{nk} . Здесь мы не приводим выражений в явном виде в силу их громоздкости. Подставляя найденные коэффициенты в (19), а после – в (14) и (10), приходим к определению комплексных потенциалов. На основе найденных функций Φ_j и Υ_j можно определить компоненты тензора напряжений из (16). В следующих главах полученное решение будет поранализировано в зависимости от физических и геометрических параметров задачи, а также исследовано на сходимость.

Глава 3. Численные результаты

На рис. 6-8 показано распределение окружных напряжений σ_{tt} в случае различных порядков асимптотического приближения (10)–(11) $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Форма искривления поверхности задается функцией $f(x_1) = -a \cos(2\pi a/x_1)$, в рамках данного исследования полагаем $a = 10$ нм и $\nu_1 = \nu_2$. В качестве нижнего материала рассматривается алюминий с параметрами Ламе $\lambda_2 = 58,17$ ГПа и $\mu_2 = 26,13$ ГПа. Свойства межфазного интерфейса определены константами $\lambda_s = 6,851$ Н/м, $\mu_s = -0,376$ Н/м [26]. Характеристики верхнего материала определяются посредством параметра $r = \mu_1/\mu_2$. В случае $r = 0$ решение соответствует однофазному твердому телу [44].

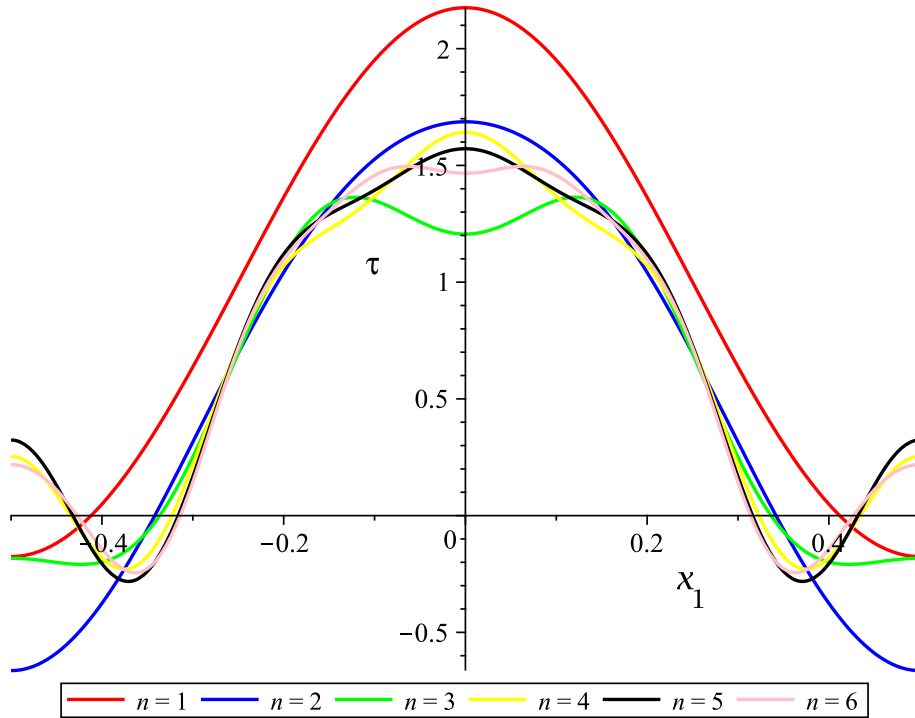


Рис. 6. Распределение окружных напряжений τ_n вдоль искривленной свободной поверхности при $r = 0$ и $\varepsilon = 0.1$.

Из графиков видно, что для определения максимальных окружных напряжений ($x_1 = 0$) в случае заданных параметров необходимо учесть как минимум второе приближение, которое существенно увеличит точность. Так, при $r = 0.1$ относительная разница между первым и вторым приближением составляет 20%. Однако, уже при рассмотрении четвертого и пятого приближения разница сокращается до 2.6%. С увеличением r скорость сходимости увеличивается.

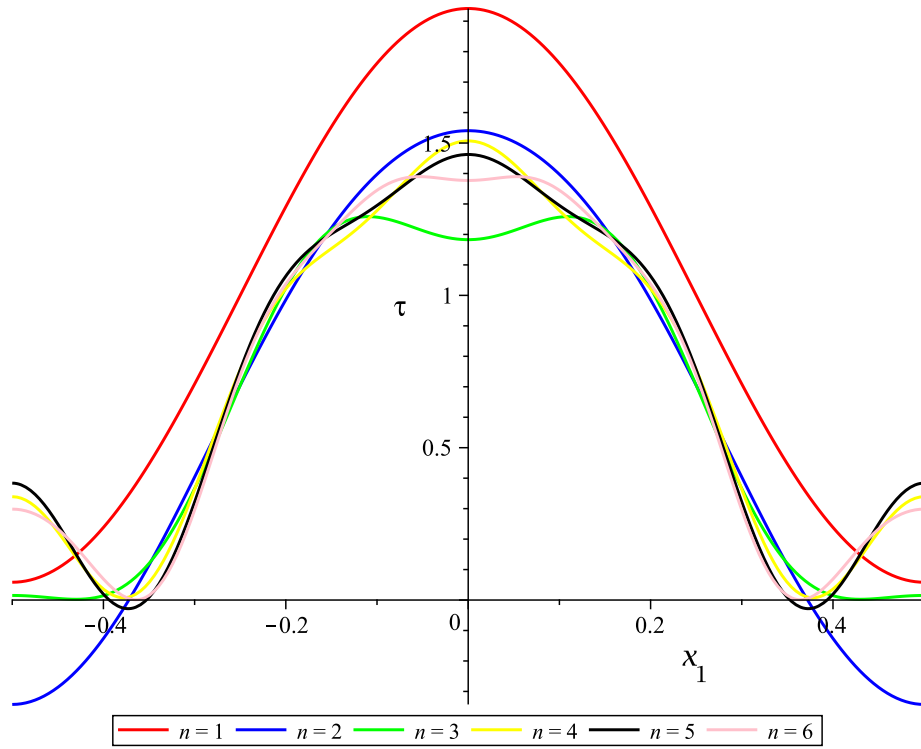


Рис. 7. Распределение окружных напряжений τ_n вдоль искривленной межфазной поверхности при $r = 0.1$ и $\varepsilon = 0.1$.

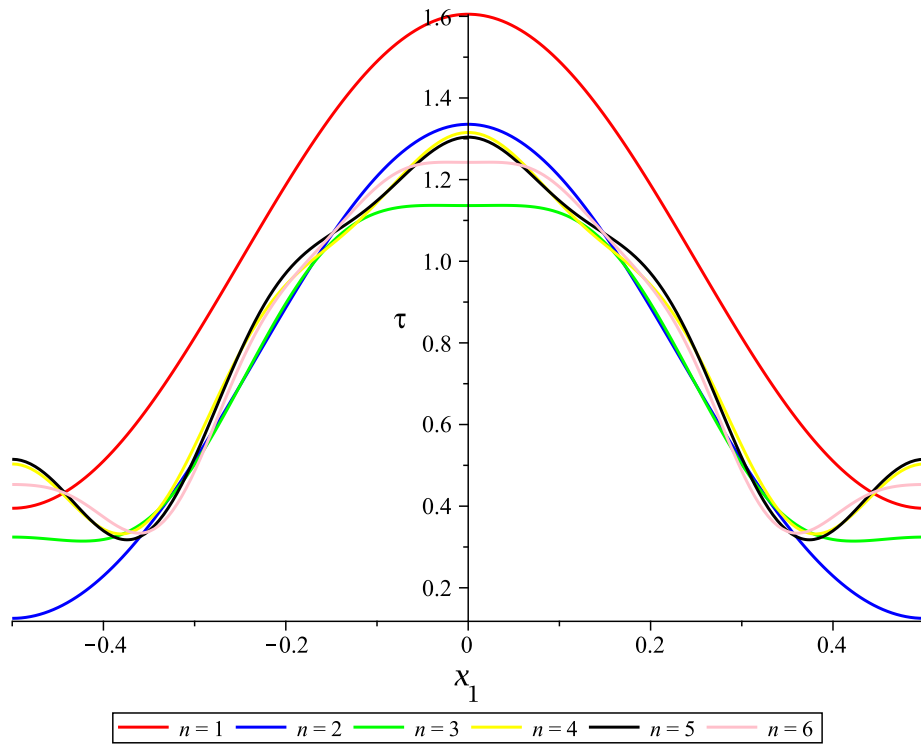


Рис. 8. Распределение окружных напряжений τ_n вдоль искривленной межфазной поверхности при $r = 0.3$ и $\varepsilon = 0.1$.

Глава 4. Метод конечных элементов

В данной главе приводится решение, полученное с использованием метода конечных элементов (МКЭ). МКЭ это численный метод, широко используемый для решения задач механики твердого тела, гидродинамики, термодинамики и других задач математической физики. Согласно этому методу, область, в которой ищется решение краевой задачи, разбивается на конечное количество подобластей, называемых элементами. В пределах каждого элемента решение приближенно представляется в виде многочлена. Коэффициенты этого многочлена выражают через заранее неизвестные значения искомой функции узловых точках рассматриваемого элемента. Объединив отдельные элементы в сетку, удастся выразить искомое решение через узловые параметры, которые затем находят, используя интегральную формулировку задачи. Таким образом, задача также сводится к решению СЛАУ [51, 52].

Для удобства использования метода были разработаны множество программных комплексов. В данной работе используется программный пакет Ansys. Эта система конечно-элементного анализа широко применяется в сфере инженерных расчётов, решения линейных и нелинейных задач механики твёрдого тела, задач механики жидкости и газа, теплопередачи и теплообмена, электродинамики и акустики [53].

В соответствии с подходом, предложенном в работе [30], рассматривается область конечных размеров с симметричными граничными условиями. При этом для объемных фаз используются 4-х узловые элементы PLANE182 (рис. 9). Для моделирования межфазной границы используются 2-х узловые стрержневые элементы LINK180 (рис. 10) с единой площадью поперечного сечения A и модулем упругости $E_s = (\lambda_s + 2\mu_s)/A$. Схема конечно-элементной модели представлена на рис. 12.

Численное решение получим, используя те же константы, которые использовались в главе 3. При размеры элемента выбираются с учетом внутренней сходимости рассматриваемой модели. На рис. 13 представлена зависимость коэффициента концентрации напряжений от значений параметра ε . На графике вместе с результатами МКЭ показаны результаты численного решения методом возмущений для различных порядков асимптотического приближения. Видно, что при увеличении параметра ε , характеризующего

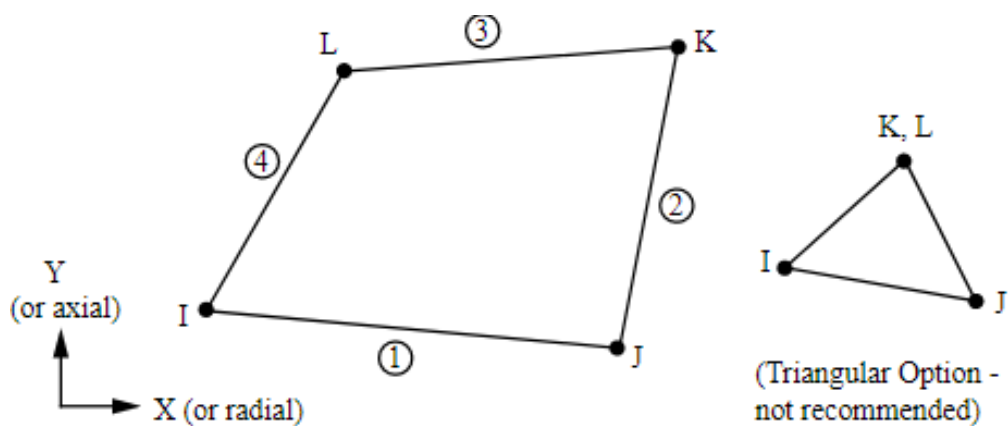


Рис. 9. Геометрия элемента PLANE182

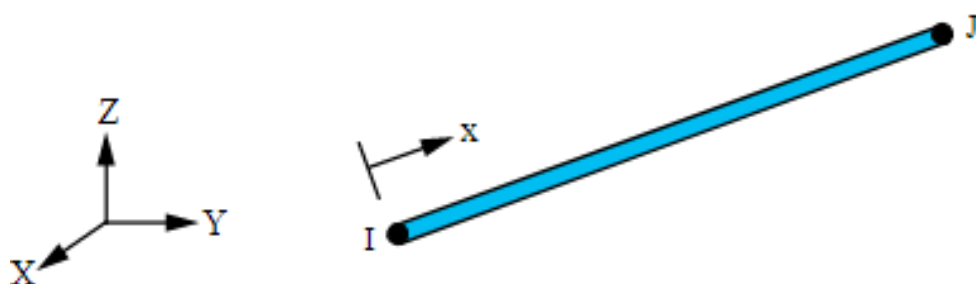


Рис. 10. Геометрия элемента LINK180

отношение амплитуды к длине волны, точность решения метода возмущений снижается и возникает необходимость рассматривать более высокий порядок приближений. Как уже отмечалось, при $\varepsilon = 0.1$ разница между первым и вторым приближением составляет 20%, а между 4 и 5 приближениями составляет 2,6%. При том же значении ε отклонение решения МКЭ по сравнению с 5 приближением метода возмущений составляет порядка 16%.

На рис. 14 показана зависимость коэффициента концентрации напряжений от параметра жесткости r при фиксированном $\varepsilon = 0.1$. Не трудно заметить, что при увеличении параметра r сходимость метода возмущений улучшается. Так при $r = 0.1$ разница между первым и вторым приближениями составляет 23%, между четвертым и пятым приближением – 4%. При $r = 0.9$ нелинейные члены ряда уже не вносят такой существенный вклад: разница между первым и вторым приближением составляет всего 4%. Разница между решением МКЭ и пятым приближением метода возмущений по мере роста r снижается от 18% до 3%.

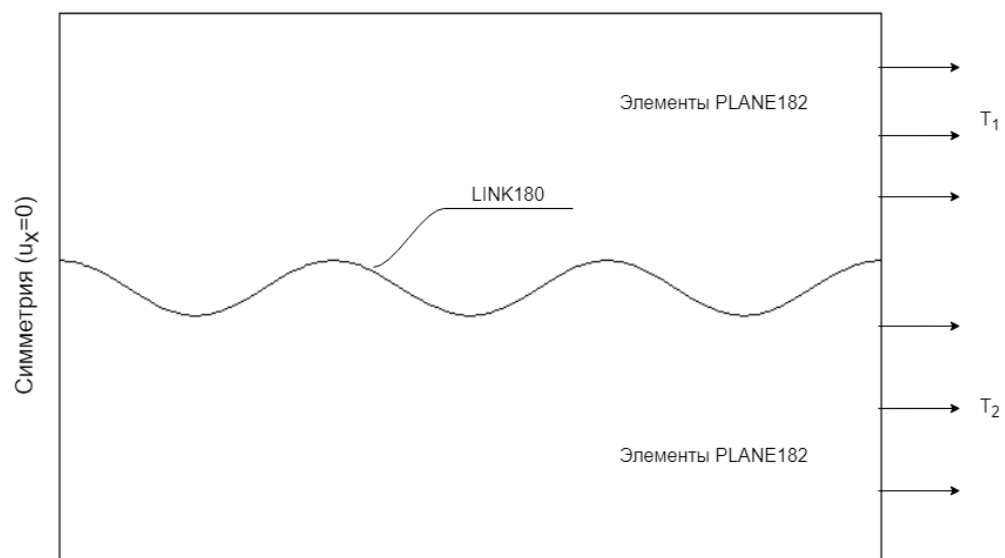


Рис. 11. Схема конечноэлементной модели

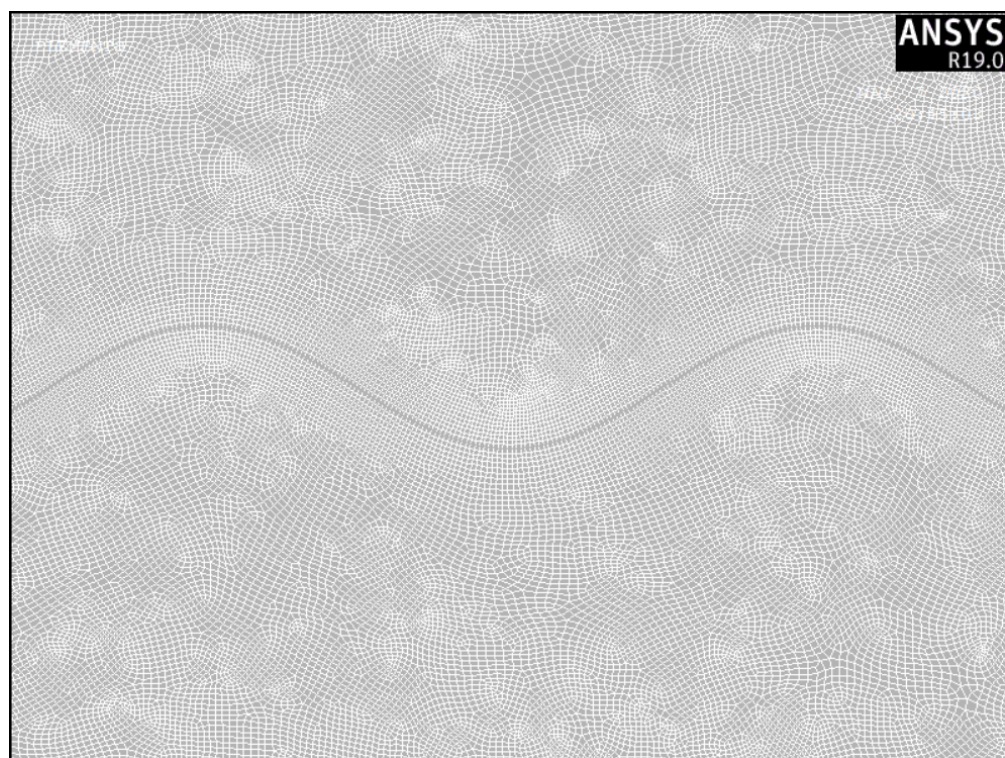


Рис. 12. Фрагмент конечноэлементной сетки вблизи межфазной границы

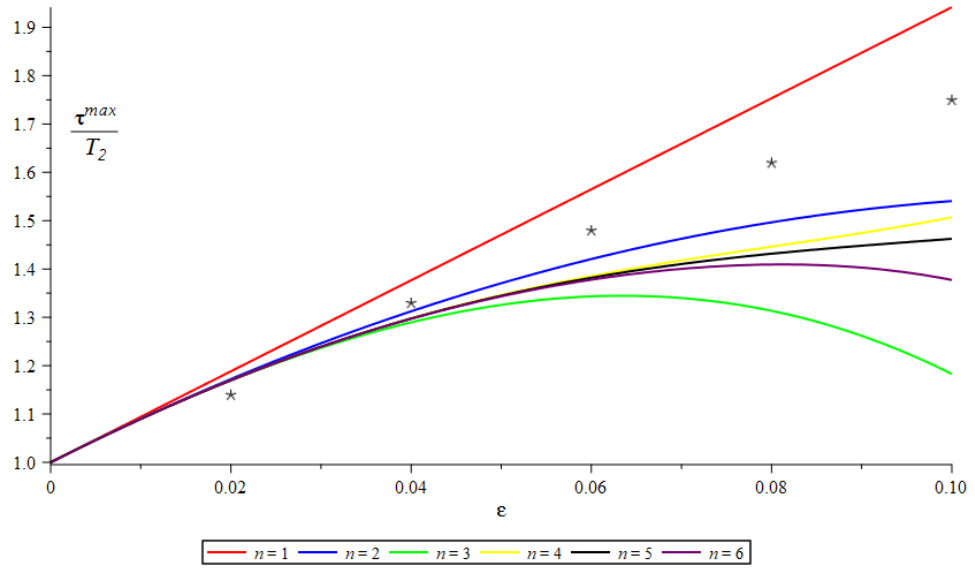


Рис. 13. Зависимость коэффициента концентрации напряжений от значений параметра ε при $r = 0.1$. Кривые линии соответствуют 1-6 приближениям метода возмущений, звездами помечены значения, полученные с помощью МКЭ

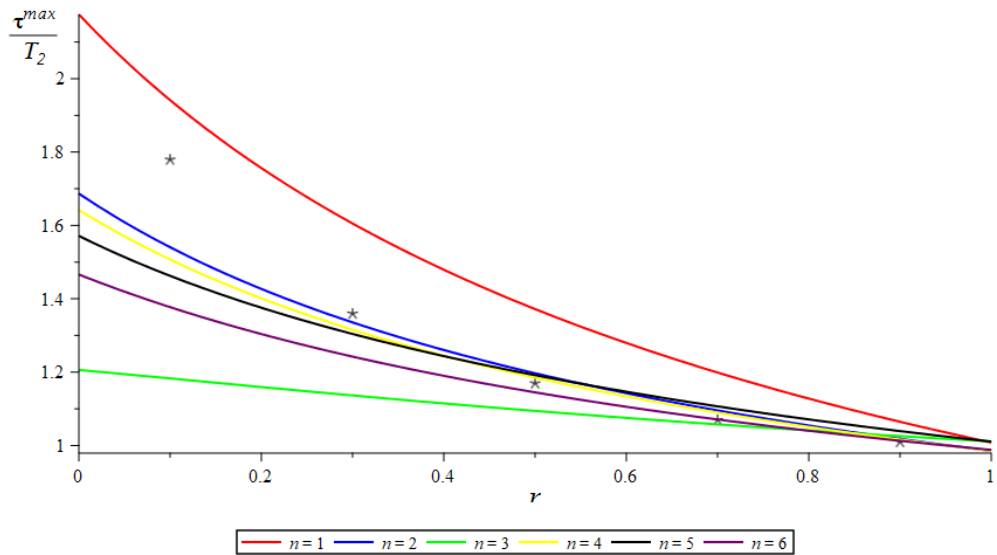


Рис. 14. Зависимость коэффициента концентрации от значений параметра r при $\varepsilon = 0.1$. Кривые линии соответствуют 1-6 приближениям метода возмущений, звездами помечены значения, полученные с помощью МКЭ

Заключение

В представленной работе была рассмотрена континуальная модель двухкомпонентного материала с наноразмерными топологическими дефектами межфазной границы. На основе определяющих Гертца-Мердока и плоской теории упругости была сформулирована и решена соответствующая краевая задача. С использованием комплексных потенциалов и метода малого параметра исследовано распределение окружных напряжений вдоль межфазного рельефа синусоидальной формы, а также зависимость коэффициента концентрации напряжений от геометрических и физических параметров задачи. Проведен анализ сходимости полученного асимптотического решения, при этом результаты расчета сравнивались с аналогичными результатами, полученными методом конечных элементов. Было показано, что сходимость представленного решения зависит от отношения амплитуды к длине волны возмущения $\varepsilon = A/a$, а также относительной жесткости рассматриваемой двухфазной системы $r = \mu_1/\mu_2$. С увеличением параметра ε необходимо учитывать большее количество членов ряда в асимптотическом разложении. Увеличение параметра r от 0 до 1 приводит к противоположному эффекту.

Полученные результаты помогут в дальнейшем более точно оценивать напряженное состояние слоистых нанокомпозитов с искривленными межфазными границами, что довольно актуально при разработке и использовании устройств микро- и оптоэлектроники. В качестве дальнейшего продолжения начатых исследований имеет смысл рассмотреть влияние формы рельефа. Такое исследование существенно расширит область применения представленного в работе метода, так как поверхность твердого тела, подверженная электрическому, химическому либо термическому воздействию, может менять свою форму от слабого возмущения до острых трещинообразных впадин.

Список литературы

1. *Kim D.-H. et al.* Stretchable and foldable silicon integrated circuits // Science. — 2008. — Vol. 320. — Pp. 507–511.
2. *Lüth H.* Solid surfaces, interfaces and thin films // Springer. — 2010. — 580 p.
3. *Панин С. В. и соавт.* Проблемы разрушения поверхностно упрочненных материалов с различной геометрией границы раздела "покрытие-основа" // Известия Томского политехнического университета. — 2011. — Т. 319. — С. 50–57.
4. *Duan H. L., Weissmuller J., Wang Y.* Instabilities of core-shell heterostructured cylinders due to diffusions and epitaxy: spheroidization and blossom of nanowires // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2008. — Vol. 56. — Pp. 1831–1851.
5. *Freund L. B., Suresh S.* Thin film materials: stress, defect formation and surface evolution // Cambridge University Press. — 2004.
6. *Mei Y., Kiravittaya S., Harazim S., Schmidt O. G.* Principles and applications of micro and nanoscale wrinkles // Materials Science and Engineering R. — 2010. — Vol. 70. — Pp. 209–224.
7. *Huang X., Hai Y., Li B., Feng X.-Q.* Wrinkling of thin films on a microstructured substrate // Mechanics of Advanced Materials and Structures. — 2017. — Pp. 1–7.
8. *Rodriguez-Hernandez J.* Wrinkled interfaces: Taking advantage of surface instabilities to pattern polymer surfaces // Progress in Polymer Science. — 2015. — Vol. 42. — Pp. 1–41.
9. *Lee G. L. et al.* Switchable transparency and wetting of elastomeric smart windows // Advanced Materials. — 2010. — Vol. 22. — Pp. 5013–5017.

10. *Balokhonov R. , Zinoviev A. , Romanova V. , Zinovieva O.* The computational micromechanics of materials with porous ceramic coatings // *Meccanica*. — 2016. — 51(2). — Pp. 415-428.
11. *Goldstein R. V., Gorodtsov V. A., Ustinov K. V.* Effect of residual stress and surface elasticity on deformation of nanometer spherical inclusions in an elastic matrix // *Physical Mesomechanics*. — 2010. — Vol. 13. — Pp. 318-328.
12. *Grekov M. A., Kostyrko S. A.* A film coating on a rough surface of an elastic body // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. — 2013. — Vol. 77. — Pp. 79–90.
13. *Grekov M. A., Kostyrko S. A.* A multilayer film coating with slightly curved boundary // *International Journal of Engineering Science*. — 2015. — Vol. 89. — Pp. 61-74.
14. *Gutkin M. Yu., Smirnov A. M.* Initial stages of misfit stress relaxation in composite nanostructures through generation of rectangular prismatic dislocation loops // *Acta Materialia*. — 2015. — Vol. 88. — Pp. 91-101.
15. *Altenbach H. , Eremeyev V. A., Morozov N. F.* Surface viscoelasticity and effective properties of thin-walled structures at the nanoscale // *International Journal of Engineering Science*. — 2012. — Vol. 53. — Pp.83-89.
16. *Cammarata R. C.* Surface and interface stress effects in thin films // *Progress in Surface Science* — 1994. — Vol. 46. — Pp. 1-38.
17. *Gao H.* A boundary perturbation analysis for elastic inclusions and interfaces // *International Journal of Solids and Structures*. — 1991. — Vol. 28. — Pp. 703–725.
18. *Cuenot S. , Fretigny C. , Demonoustier-Champagne S. , Nysten B.* Surface tension effect on the mechanical properties of nanomaterials measured by atomic force microscopy // *Physical Review B*. — 2004. — Vol. 69. — P. 165410.

19. *Jiang W. G., Su J. J., Feng X. Q.*, Effect of surface roughness on nanoindentation test of thin films // Engineering Fracture Mechanics. — 2008. — Vol. 75. — Pp. 4965-4072.
20. *Lich L. V., Shimada T., Wang J. Masuda K., Bui T. Q., Dinh V. H., Kitamura T.* Continuum thermodynamics of unusual domain evolution-induced toughening effect in nanocracked strontium titanate // Engineering Fracture Mechanics. — 2018. — Vol. 190. — Pp. 232-244.
21. *Kim H. K., Lee S. H., Yao Z., Wang C., Kim N. Y.* Suppression of interface roughness between BaTiO₃ film and substrate by Si₃N₄ buffer layer regarding aerosol deposition process // Journal of Alloys and Compounds. — 2015. — Vol. 653, — Pp. 69–76.
22. *Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Фомин В. М.* Моделирование процессов соударения твердых тел методом молекулярной динамики // ДАН. — 1997. — Т. 356. — С. 466–469.
23. *Игошкин А. М., Головнев В. М., Фомин В. М.* Молекулярно-динамическое исследование формирования границы раздела между металлическими нанопленками // Вестник ЮУрГУ Серия "Математическое моделирование и программирование". — 2013. — Т. 6. — С. 13–24.
24. *Gao E., Lin S. Z., Buehler M. J., Feng X. Q., Xu Z.* Mechanical exfoliation of two-dimensional materials // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2018. — Vol. 115 — Pp. 248–262.
25. *Shenoy V. B.* Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces // Physical Review B. — 2005. — Vol. 71. — P. 094104.
26. *Miller R. E., Shenoy V. B.* Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements // Nanotechnology. — 2000. — Vol. 11. — Pp. 139–147.
27. *Подстригач Я. С., Повстенко Ю.* Об одном варианте нелинейных уравнений континуальной теории подвижных дефектов // Доклад АН СССР. — 1983. — Т. 269. — С. 315–316.

28. *Benveniste Y., Miloh T.* Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity // *Mechanics of Materials*. — 2001. — Vol. 33. — Pp. 309–323.
29. *Lurie S., Belov P.* Gradient effects in fracture mechanics for nanostructured materials // *Engineering Fracture Mechanics*. — 2014. — Vol. 130. — Pp. 3–11.
30. *Tian L., Rajapakse R. K. N. D.* Finite element modeling of nanoscale inhomogeneities in an elastic matrix // *Computational Materials Science*. — 2007. — Vol. 41, — Pp. 44–53.
31. *Gurtin M. E., Murdoch A. I.* A continuum theory of elastic material surfaces // *Archive of Rational Mechanics Analysis*. — 1975. — Vol. 57. — Pp. 291–323.
32. *Gurtin M. E., Murdoch A. I.* Surface stress in solids // *International Journal of Solids and Structures*. — 1978. — Vol. 14. — Pp. 431–440.
33. *Grekov M.A. et al.* A periodic set of edge dislocations in an elastic solid with a planar boundary incorporating surface effects // *Engineering Fracture Mechanics*. — 2017. — Vol. 186. — Pp. 423–435.
34. *Sharma P., Ganti S.* Size-dependent Eshelby's tensor for embedded nanoinclusions incorporating surface/interface energies // *Journal of Applied Mechanics*. — 2004. — Vol. 71. — Pp. 563–671.
35. *Tian L., Rajapakse R. K. N. D.* Analytical solution for size-dependent elastic field of a nanoscale circular inhomogeneity // *Journal of Applied Mechanics*. — 2007. — Vol. 74. — Pp. 568–574.
36. *Avazmohammadi R., Yang F., Abbasian S.* Effect of interface stresses on the elastic deformation of an elastic half-plane containing an elastic inclusion // *International Journal of Solids and Structures*. — 2012. — Vol. 53. — Pp. 83–89.
37. *Duan H. L., Weissmüller J., Wang Y.* Instabilities of core-shell heterostructured cylinders due to diffusion and epitaxy: spheroidization and

- blossom of nanowires // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2008. – Vol. 56. – Pp. 1831-1851.
38. *He L. H., Li Z. R.* Impact of surface stress on stress concentration // International Journal of Solids and Structures. – 2006. – Vol. 43. – Pp. 6208-6219.
 39. *Kostyrko S., Shuvalov G.* Surface elasticity effect on diffusional growth of surface defects in strained solids // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2019. – Vol. 31. – Pp. 1795-1803.
 40. *Freund L. B.* Evolution of waviness on the surface of a strained elastic solid due to stress-driven diffusion // International Journal of Solids and Structures. – 1995. – Vol. 28. – Pp. 911-923.
 41. *Gao H.* Some general properties of stress-driven surface evolution in a heteroepitaxial thin film structure // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 1994. – Vol. 42. – Pp. 741-742.
 42. *Vikulina Yu. I., Grekov M. A., Kostyrko S. A.* Model of film coating with weakly curved surface // Mechanics of Solids. – 2010. – Vol. 45. – Pp. 778-788.
 43. *Kostyrko S. A., Grekov M. A.* Elastic field at a rugous interface of a bimaterial with surface effects // Engineering Fracture Mechanics. — 2019. — Vol. 216. — P. 106507.
 44. *Grekov M. A., Kostyrko S. A.* Surface effects in an elastic solid with nanosized surface asperities // International Journal of Solids and Structures. — 2016. — Vol. 96. — Pp. 153–161.
 45. *Kostyrko S. A., Grekov M. A., Altenbach H.* Stress concentration analysis of nanosized thin film coating with rough interface // Continuum Mechanics and Thermodynamics. — 2019. — Vol. 31. — Pp. 1863–1871.
 46. *Chen T. , Chiu M. -S., Weng C. -N.* Derivation of the generalized young-laplace equation of curved interfaces in nanoscaled solids // Journal of Applied Physics. 2006. — Vol. 100. — P. 074308.

47. *Мусхелишвили Н. И.* Некоторые основные задачи математической теории упругости — М.:Наука, 1966. 708 с.
48. *Goursat E.* Sur l'equation $\Delta\Delta u = 0$ // Bulletin de la Société Mathématique de France — 1898. — Vol. 26. — Pp. 236–237.
49. *Колосов Г. В.* Применение комплексной переменной к теории упругости — М.-Л.:ОНТИ, 1935. 227 с.
50. *Dundurs J.* Discussion: Edge-bonded dissimilar orthogonal elastic wedges under normal and shear loading // Journal of Applied Mechanics. — 1969. — Vol. 36. — Pp. 650–652.
51. *Стренг Г., Фикс Дж.* Теория метода конечных элементов. Пер. с англ. М.:Мир, 1977. 352 с.
52. *Оден Дж.* Конечные элементы в нелинейной механике сплошных сред. М.:Мир, 1976. 464 с.
53. *Каплун А. Б., Морозов Е. М., Олферьева М. А.* Ansys в руках инженера: Практическое руководство. М.:Едиториал УРСС, 2003. 272с.